

Verbale dell'Assemblea della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana del 08.09.2014.

Il giorno lunedì 8 settembre 2014, alle ore 18:15, presso l'aula CF2 (Cubo 32C) del campus di Arcavacata in concomitanza con il XXV Congresso Nazionale della SCI, ha inizio l'assemblea della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC), regolarmente convocata dal Presidente Prof. Benedetta Mennucci. L'ordine del giorno risulta essere il seguente:

- 1) Comunicazioni del Presidente
- 2) Relazione sulle attività della divisione
- 3) Bilancio consuntivo 2013 e preventivo 2014
- 4) Vincitori edizione 2014 Medaglia Roetti e premio Scrocco
- 5) Intervento del Prof. A. Laganà, chair della Divisione di Chimica Computazionale di Euchems, su azioni europee di interesse per la comunità italiana dei chimici computazionali
- 6) Organizzazione di una Scuola di Chimica Teorica e Computazionale
- 7) Organizzazione del congresso divisionale da tenersi a Catania nel 2015, congiuntamente al 1st European Conference on Physical, Theoretical, and Computational Chemistry dell'Euchems
- 8) varie ed eventuali

1) Comunicazioni del Presidente

Il Presidente comunica che la divisione nell'ultimo anno ha subito un calo del numero di iscrizioni, problema molto delicato, peraltro comune anche alla SCI nel suo complesso. E' quindi necessario tentare un recupero dei vecchi iscritti e coinvolgerne di nuovi. Si pensa che ci possano essere due classi di potenziali nuovi soci: una di queste sono i giovani, quindi e' necessario effettuare del proselitismo, ognuno nella propria sede, l'altra classe di potenziali soci sono gli italiani all'estero.

Si propone quindi di estendere in questa direzione i premi che la divisione assegna ogni anno, il premio Roetti e il premio Scrocco. L'attuale regolamento prevede che i candidati debbano avere svolto la loro ricerca prevalentemente in Italia. Quindi si propone di affiancare il premio Roetti con un nuovo premio destinato a ricercatori italiani con posizione permanente all'estero.

Il Dott. Pedone propone di istituire un premio per la migliore tesi di dottorato, per incentivare l'interesse dei giovani nei confronti della DCTC. Interviene il Prof. Lagana', il quale ricorda all'Assemblea l'esistenza della rivista elettronica, VIRT&L-COMM (<https://www3.compchem.unipg.it/ojs/index.php/ojs>), organo della organizzazione virtuale COMPCHEM composta da tre sezioni (EDU, ICT, R&D) sulla quale possono essere pubblicati report, tesi, etc di interesse scientifico senza costi e senza cessione della proprietà intellettuale.

2) Relazione sulle attività della Divisione

Il Presidente ricorda l'assegnazione dei premi Roetti e Scrocco, l'organizzazione del congresso della DCTC, che non si e' svolto nel 2014, ma si terra' nel 2015, e l'organizzazione dei lavori della DCTC in seno al congresso SCI2014.

3) Bilancio Consuntivo 2013 e Bilancio Preventivo 2014

Il Presidente passa la parola al Prof. Stener, Tesoriere della Divisione, per illustrare il bilancio consuntivo 2013. Il bilancio consuntivo 2013 si è chiuso con un saldo cassa pari a 4396 Euro. Nel 2013 ci sono state entrate pari a 4506 Euro (dal congresso DCTC2013 di Padova) e uscite pari a 2428, di cui 2000 per trasferimenti alla sede centrale per il risanamento di bilancio della SCI, circa 200 euro di spese bancarie e 230 euro per la medaglia Roetti e le due targhe Scrocco. Si rileva anche un residuo attivo pari a 500 Euro, derivante da sponsorizzazioni, versati sul c/c nel corso del 2014. Il bilancio consuntivo 2013 era già stato visionato ed approvato all'unanimità nel consiglio direttivo del 13.05.2014. Il Presidente apre la discussione per eventuali chiarimenti. Il Presidente pone in votazione il Bilancio Consuntivo 2013 della DCTC, l'Assemblea approva all'unanimità.

Il Presidente passa nuovamente la parola al Prof. Stener, Tesoriere della divisione, per illustrare il bilancio preventivo 2014.

Per quanto riguarda il bilancio preventivo 2014, come unica voce di entrata risultano i 500 Euro relativi a sponsorizzazioni dell'anno precedente (residuo attivo 2013), in quanto non è previsto il congresso divisionale. Per le uscite si prevedono i consueti 200 euro di gestione c/c, 230 Euro per la medaglia Roetti e la targa Scrocco, 285 Euro per una missione e infine 1000 Euro per le 4 borse di studio riservate a soci effettivi DCTC non strutturati per partecipare al congresso SCI2014. Quindi si prevede un saldo cassa al 31.12.2014 pari a 3181 Euro. Il bilancio preventivo 2014 era già stato visionato ed approvato all'unanimità nel consiglio direttivo del 13.05.2014. Il Presidente apre la discussione per eventuali chiarimenti. Il Presidente pone in votazione il Bilancio Preventivo 2014 della DCTC, l'Assemblea approva all'unanimità.

4) Vincitori edizione 2014 Medaglia Roetti e premio Scrocco

Il Presidente annuncia i vincitori del "Premio Carla Roetti" 2014 per ricercatori al di sotto dei quarant'anni che si siano distinti per creatività, capacità di innovazione, autonomia e indipendenza nello sviluppo e nell'applicazione di metodologie in chimica teorica e computazionale, nonché del "Premio Eolo Scrocco" 2014 per giovani ricercatori al di sotto dei trentatré anni attivi nello sviluppo e nell'applicazione di metodologie in chimica teorica e computazionale. Per l'edizione 2014, sono giunte 5 domande per il premio Roetti e 6 domande per il premio Scrocco. L'assegnazione è stata fatta interpellando una commissione di italiani all'estero, giovani esperti in varie aree della chimica teorica e computazionale: Gagliardi, Troisi, Sterpone e Sulpizi. Le tematiche coprivano varie tematiche di interesse per la DCTC: sviluppo di metodi sia quantistici che classici, dinamica molecolare, fasi condensate e materiali. Tutti i commissari hanno dichiarato che i candidati erano tutti di alto livello. Il Consiglio Direttivo, preso atto delle valutazioni espresse dalla suddetta commissione esterna composta da ricercatori italiani che svolgono la loro attività all'estero, ha unanimemente deciso di assegnare il "Premio Carla Roetti" 2014 alla Dott. Mariachiara Pastore per il suo originale contributo allo sviluppo di metodi ab-initio multireference e per le applicazioni computazionali nel campo del fotovoltaico. Ha altresì unanimemente deciso di assegnare il "Premio Eolo Scrocco" 2014 al Dott. Filippo Lipparini per il suo originale contributo allo sviluppo e l'applicazione di nuovi algoritmi e metodi numerici nel campo dei modelli ibridi QM/classici.

I Premi saranno assegnati nel corso del prossimo congresso divisionale 2015 della DCTC che si svolgerà a Catania nel settembre 2015.

5) Intervento del Prof. A. Laganà, chair della Divisione di Chimica Computazionale (DCC) di Euchems, su azioni europee di interesse per la comunità italiana dei chimici computazionali

Il Prof. Laganà riferisce sul congresso Euchems svoltosi ad Istanbul (il congresso si tiene tutti gli anni pari) e annuncia che:

- 1) il Chair della DCC è stato nominato al direttivo Euchems (da formalizzare a fine ottobre)
- 2) c'è la possibilità di nominare un secondo membro italiano nel direttivo della DCC
- 3) all'interno dell'evoluzione dei rapporti tra Euchems ed ECTN si è raggiunta una intesa per favorire la diffusione degli eurolabel (bachelor, master, dottorato) e degli Echemtest (tra cui quelli di chimica computazionale)
- 4) si stanno consolidando i rapporti economici e finanziari tra Euchems e le sue divisioni. Come conseguenza si avrà che, a fronte di servizi centralizzati resi alle stesse, Euchems tratterrà nel suo bilancio una frazione degli utili provenienti da attività delle Divisioni
- 5) il congresso Euchems ECC6 del 2016 si terrà a Siviglia. Per curare le attività della DCC è stato proposto Peter Szalay
- 6) il congresso EUCCO CC 10 della DCC si terrà nel 2015 a Fulda (DE) dal 30 agosto al 4 settembre
- 7) la DCC vede con favore il rafforzamento del network di calcolo INSTM e incoraggia i propri membri a partecipare al progetto di Virtual Research Environment (VRE) per ricerca, innovazione e training in fase di preparazione per la call di h2020 di Gennaio

8) la DCC vede anche con favore la maggiore attenzione dei propri membri alla ricerca orientata al servizio e imprenditorialità e considera positivamente la proposta di aggregare a tale proposta la costituzione di una scuola ad essa una scuola estiva e un cluster di spinoff.

6) Organizzazione di una Scuola di Chimica Teorica e Computazionale

Il Presidente propone di organizzare una scuola di chimica teorica e computazionale, il direttivo ha già iniziato una valutazione di questa ipotesi, l'idea sulla quale il direttivo si è orientato, consiste in scuola rivolta a dottorandi non esclusivamente teorici computazionali, ma che lavorino anche in altri ambiti e che vogliano assimilare competenze in campo teorico computazionale. La Scuola potrebbe ripetersi ogni 2 o 3 anni, eventualmente insieme al congresso. Si propone di realizzare la prima edizione a Pisa focalizzandola su proprietà e processi in fase condensata. Il Presidente apre la discussione. Laganà osserva che Pisa è un centro/nodo CECAM, che potrebbe essere coinvolto, ipotesi sulla quale il Prof. Pacchioni dichiara che se l'iniziativa fosse fatta sotto l'egida del CECAM perderebbe il ruolo di iniziativa della Divisione. Laganà ricorda che una volta anche il Gruppo Interdivisionale di Chimica Computazionale (GICC) organizzava una scuola ma poi l'iniziativa si è interrotta, pertanto suggerisce al direttivo di analizzare i motivi che hanno portato a bloccare l'iniziativa per non ripetere gli stessi errori. Il Dott. Pomelli interviene riportando la sua esperienza di lavoro in un gruppo sperimentale, nel campo organico c'è molto interesse ma bisogna stare molto attenti a come saranno proposti i vari argomenti. Il Presidente chiede all'Assemblea se ci sono perplessità, o se qualche socio desidera proporre altre sedi, inoltre invita tutti i presenti anche a proporsi come docenti della scuola. Probabilmente non sarà possibile organizzare la scuola nel 2015, ma conta che al massimo nel 2016 si potrà organizzare la prima edizione.

7) Organizzazione del congresso divisionale da tenersi a Catania nel 2015, congiuntamente al 1st European Conference on Physical, Theoretical, and Computational Chemistry dell'Euchems

Il Presidente riferisce all'Assemblea che si sta delineando l'idea di fondere il congresso DCTC con quello della divisione di chimica fisica e con l'iniziativa euchems, 1st European Conference on Physical, Theoretical, and Computational Chemistry, a Catania il 6-11 settembre 2015, con partecipazione di ricercatori europei e italiani. Ci sarà una riunione del comitato organizzatore il prossimo 26 settembre 2014 su cui il Presidente riferirà, il congresso sarà europeo ma anche di divisione: la prima parte europea, seconda parte italiana con i congressi delle due divisioni in parallelo. Ci si aspetta un'ampia partecipazione, ma sarà anche molto più complicato ripartire spese e attivi delle divisioni. È importante tenere bassa la quota di iscrizione. Pacchioni raccomanda di preservare l'identità della DCTC. Interviene Suffritti che ricorda all'Assemblea che nel CC della SCI si è discusso dei rapporti con IUPAC, di cui ora c'è la sezione di chimica fisica e la IUPAC ha da poco un nuovo presidente, inoltre il presidente della SCI Prof. Riccio auspica che la partecipazione alle iniziative IUPAC porti la SCI ad avere un maggior peso nella IUPAC stessa.

8) varie ed eventuali

Interviene Civalleri, il quale informa l'Assemblea che il prossimo anno a Torino nel periodo 26-31 luglio si terrà il congresso CHITEL chimici teorici di espressione latina, prossimamente sarà attivato il sito internet, si prevede una riduzione per gli iscritti alla DCTC della quota iscrizione, sono previste 5 conferenze plenarie e varie keynote.

Avendo esaurito i punti all'ordine del giorno e non essendoci altro da discutere la seduta è tolta alle ore 19:20.

Arcavacata di Rende, 8 settembre 2014

Il Segretario

Prof. Mauro Stener

Il Presidente

Prof. Benedetta Mennucci